

### WS1

Channel 1

6月16日 (水) / June 16 (Wed.) 18:00 ~ 20:30

Japanese Session

#### 分子夾雜の蛋白質科学における新展開

#### New trends of protein science in multimolecular crowding biosystems

#### 共催：新学術領域 分子夾雜の生命化学

蛋白質は、細胞や生体組織などの多くの生体分子が複雑かつ高濃度に入り混じった分子夾雜環境で機能している。本企画では、このような分子夾雜環境で機能する蛋白質の構造、機能解析、あるいは機能制御に有用な新しい分子ツールや解析技術の最前線を紹介し、分子夾雜環境にある蛋白質科学の今後の展開について議論を行う。

Proteins function under multimolecular crowding biosystems such as cells and biological tissues, in which many biomolecules are mixed in a complex and exist at high concentration. In this symposium, we introduce the new molecular tools and technologies, which are useful for structure and functional analyses, and functional control of proteins existing under the complicated biological systems. We also discuss future trends of protein science exploiting these useful tools and technologies.

オーガナイザー：浜地 格（京都大学）、王子田 彰夫（九州大学）

Organizers: Itaru Hamachi (Kyoto Univ.), Akio Ojida (Kyushu Univ.)

[18:00] はじめに

#### Opening Remarks

○浜地 格 (Itaru Hamachi)

京都大学 (Kyoto Univ.)

#### WS1-01 [18:05] 抗体クリック反応による細胞表面選択的凝集による機能制御

#### Antibody Clicking as a Strategy to Modify Antibody Functionalities on the Surface of Targeted Cells

○小松 徹<sup>1</sup> (Toru Komatsu)、姜 悅<sup>1</sup> (Etsu Kyo)、石井 遥暉<sup>1</sup> (Haruki Ishii)、山口 藍子<sup>2</sup> (Aiko Yamaguchi)、土釜 恭直<sup>2</sup> (Kyoji Tsukikama)、浦野 泰照<sup>1,3,4</sup> (Yasuteru Urano)

<sup>1</sup>東大・薬 (Grad. Sch. Pharm. Sci., Univ. of Tokyo)、<sup>2</sup> Health Science Center at Houston, Univ. of Texas,

<sup>3</sup>東大・医 (Grad. Sch. Med. Univ. of Tokyo)、<sup>4</sup>AMED-CREST

#### WS1-02 [18:29] コバレントドラッグのための創薬蛋白質有機化学

#### Medicinal protein organic chemistry for covalent drug discovery

○王子田 彰夫 (Akio Ojida)

九大院・薬 (Grad. School of Pharm. Sci., Kyushu Univ.)

#### WS1-03 [18:53] 単色蛍光タンパク質型 FLIM センサーを用いた ATP の時空間定量イメージング

#### Quantitative spatio-temporal imaging of ATP using a single fluorescent protein FLIM sensor

○新井 敏<sup>1</sup> (Satoshi Arai)、サルケア サティア<sup>1</sup> (Satya Sarker)、北口 哲也<sup>2</sup> (Tetsuya Kitaguchi)

<sup>1</sup>金沢大・WPI ナノ研 (WPI-NanoLSI, Kanazawa Univ.)、<sup>2</sup>東京工業大学・科学技術創成研究院 (IIR, Tokyo Tech)

#### WS1-04 [19:17] 走査型プローブエレクトロスプレーイオン化法による生体組織内多次元化学分布情報計測

#### Measurement of Multidimensional Chemical Distribution Information in Biological Tissues by Scanning Probe Electrospray Ionization

○大塚 洋一 (Yoichi Otsuka)

阪大・理・化 (Dept. of Chem., Grad Sch. of Sci., Osaka Univ.)

- WS1-05** [19:41] 小胞体内酸化的フォールディングの触媒システムの理解  
**Understanding the mechanism by which the ER-resident disulfide-catalysts assist their client oxidative folding**  
○奥村 正樹<sup>1,2</sup> (Masaki Okumura)  
<sup>1</sup>東北大・学際研 (FRIS, Tohoku Univ.), <sup>2</sup>JST 創発 (FOREST, JST)
- WS1-06** [20:05] 分子夾雜環境が変調するタンパク質の構造と機能  
**Modulation of structure and function of intracellular proteins by macromolecular crowding**  
○西田 紀貴 (Noritaka Nishida)  
千葉大・院薬 (Grad. Sch. Pharm. Sci, Chiba Univ.)

---

## WS2

Channel 2  
6月16日(水) / June 16 (Wed.) 18:00 ~ 20:30

Japanese/English Session

### 生命金属科学の最前線：生命における金属のはたらき Frontiers in Bio-metal science: the roles of metals in life

#### 共催：新学術領域 生命金属科学

生体内に存在するさまざまな微量金属元素が生命活動を維持する上で重要な役割を果たしていることが明らかになってきた。本ワークショップでは、「生命金属」のはたらきに光をあて、分子から細胞・個体レベルの研究の最前線をご紹介いただく。金属とタンパク質の相互作用が巧みにコントロールする様々な生命現象を、マルチスケールで統合的に議論する。

Various metallic elements are involved in fundamental processes for maintaining cellular homeostasis. In this workshop, to shed light on the role of “biometals”, researchers in this field are going to present their recent findings. Biological phenomenon accomplished with biometals will be comprehensively discussed from molecular to whole-body levels.

---

オーガナイザー：天貝 佑太（東北大学）、横山 武司（東北大学）  
Organizers: Yuta Amagai (Tohoku Univ.), Takeshi Yokoyama (Tohoku Univ.)

---

- WS2-01** [18:00] 計算科学に基づく金属タンパク質動態の理論解析  
**Theoretical analyses on dynamics of metalloproteins based on computational science**  
○重田 育照 (Yasuteru Shigeta)  
筑波大・計セ (Center for Computational Sciences, Univ. of Tsukuba)

- WS2-02** [18:15] Probing functional and structural differences of quinol dependent Nitric Oxide Reductases' (qNOR) within a lipidic nanodisc environment  
○Chai Gopalasingam<sup>1</sup>、Hiroaki Yamaoka<sup>1</sup>、Akitoshi Shibata<sup>1</sup>、Kouki Fukumoto<sup>1</sup>、  
Hideki Shigematsu<sup>2</sup>、Takehiko Tosh<sup>2</sup>、Kazumasa Muramoto<sup>1</sup>、Yoshitsugu Shiro<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Graduate School of Life Sciences, University of Hyogo、<sup>2</sup>RIKEN SPring-8 Center

- WS2-03** [18:30] 好気性細菌におけるヒドロゲナーゼの金属中心構築の分子機構  
**Molecular mechanism of metal center assembly in [NiFe]-hydrogenase from aerobic bacteria**  
○村木 則文<sup>1,2</sup> (Norifumi Muraki)、青野 重利<sup>1,2</sup> (Shigetoshi Aono)  
<sup>1</sup>自然科学研究機構・生命セ (NINS, ExCELLS)、<sup>2</sup>自然科学研究機構・分子研 (NINS, IMS)

- WS2-04** [18:45] **tRNA thiolation mechanism catalyzed by iron-sulfur enzymes**  
 (1P-24) ○石坂 優人<sup>1</sup> (Masato Ishizaka)、陳 明皓<sup>2</sup> (Minghao Chen)、奈良井 峻<sup>1</sup> (Shun Narai)、  
 堀谷 正樹<sup>3</sup> (Masaki Horitani)、田中 良和<sup>2,4</sup> (Yoshikazu Tanaka)、于 健<sup>2</sup> (Jian Yu)、姚 閔<sup>1,2</sup> (Min Yao)  
<sup>1</sup>北大・生命 (Life Sci., Hokkaido Univ.)、<sup>2</sup>北大・先端生命 (Adv. Life Sci., Hokkaido Univ.)、<sup>3</sup>佐賀大・農 (Agri., Saga Univ.)、  
<sup>4</sup>東北大・生命 (Life Sci., Tohoku Univ.)
- WS2-05** [19:00] **化膿連鎖球菌由来金属トランスポーターに対する機能阻害剤探索**  
**Development of functional inhibitors to metal ion transporters from Streptococcus pyogenes**  
 ○中木戸 誠<sup>1,2</sup> (Makoto Nakakido)、竹内 美結<sup>1</sup> (Miyu Takeuchi)、伊藤 翔<sup>3</sup> (Sho Ito)、  
 相川 知宏<sup>4</sup> (Chihiro Aikawa)、長門石 曜<sup>5</sup> (Satoru Nagatoishi)、中川 一路<sup>4</sup> (Ichiro Nakagawa)、  
 津本 浩平<sup>1,2,5</sup> (Kouhei Tsumoto)  
<sup>1</sup>東大院・工・バイオエンジ (Dept. of Bioeng., Sch. of Eng., Univ. of Tokyo)、  
<sup>2</sup>東大院・工・化生 (Dept. of Chem. Biotech., Sch. of Eng., Univ. of Tokyo)、  
<sup>3</sup>株式会社リガク応用技術センター ROD (単結晶解析) グループ (Rigaku Corporation ROD Single Crystal Analysis Group Application Laboratories)、<sup>4</sup>京大院・医 (Sch. of Med., Univ. of Kyoto)、<sup>5</sup>東大・医科研 (Inst. of Med. Sci., Univ. of Tokyo)
- WS2-06** [19:15] **ナノディスク再構成型 BhuUV-T による段階的な基質輸送の分光学的観察**  
 (1P-75) **Stepwise transport revealed by spectroscopic analyses of ABC transporter: BhuUV, reconstituted in nanodisc**  
 ○木村 哲就<sup>1</sup> (Tetsunari Kimura)、浅田 拓也<sup>1</sup> (Takuya Asada)、林 沙英<sup>1</sup> (Sae Hayashi)、  
 鍔木 基成<sup>1</sup> (Motonari Tsubaki)、城 宜嗣<sup>2</sup> (Yoshitsugu Shiro)、杉本 宏<sup>3</sup> (Hiroshi Sugimoto)  
<sup>1</sup>神戸大・院理・化 (Dept. of Chem., Grad. Sch. of Sci., Kobe Univ.)、  
<sup>2</sup>兵県大・院生命理 (Grad. Sch. of Life Sci., Hyogo Pref. Univ.)、<sup>3</sup>理研・SPRING-8 (SPRING-8 Cent., RIKEN)
- WS2-07** [19:30] **細胞内で金属イオンを失った SOD1 タンパク質が辿る運命**  
**A mechanism of how SOD1 reacquires the metal ions once dissociated in cells**  
 ○古川 良明 (Yoshiaki Furukawa)  
 慶應・理工・化学 (Dept. of Chem., Keio Univ.)
- WS2-08** [19:45] **初期分泌経路における亜鉛濃度制御が小胞体—ゴルジ体シャペロン ERp44 の機能をコントロールする**  
**Regulated Zn<sup>2+</sup> concentrations at the early secretory pathway control function of an ER-Golgi chaperone, ERp44**  
 ○天貝 佑太<sup>1</sup> (Yuta Amagai)、山田 桃<sup>1</sup> (Momo Yamada)、渡邊 朝美<sup>1</sup> (Tomomi Watanabe)、  
 小和田 俊行<sup>1</sup> (Toshiyuki Kowada)、榎本 悟史<sup>2,3</sup> (Satoshi Naramoto)、渡部 聰<sup>1</sup> (Satoshi Watanabe)、  
 経塚 淳子<sup>2</sup> (Junko Kyozuka)、Roberto Sitia<sup>4</sup>、水上 進<sup>1</sup> (Shin Mizukami)、稻葉 謙次<sup>1</sup> (Kenji Inaba)  
<sup>1</sup>東北大・多元研 (IMRAM, Tohoku Univ.)、<sup>2</sup>東北大・院・生命科学 (Grad. Sch. Life Sci., Tohoku Univ.)、  
<sup>3</sup>北大・院理 (Fuc. of Sci., Hokkaido Univ.)、<sup>4</sup>IRCCS-OSR
- WS2-09** [20:00] **ZIP 輸送体が輸送した金属の差異により細胞内亜鉛代謝が攪乱する**  
**Intracellular zinc homeostasis is controlled by ZIP through divalent cations that they mobilize**  
 ○西藤 有希奈<sup>1,2</sup> (Yukina Nishito)、長松 詩野<sup>1</sup> (Shino Nagamatu)、神戸 大朋<sup>1</sup> (Taiho Kambe)  
<sup>1</sup>京大院・生命 (Graduate School of Biostudies, Kyoto Univ.)、<sup>2</sup>京都薬科大学 (Kyoto Pharmaceutical Univ.)
- WS2-10** [20:15] **疾患脳から迫る疾患特異的金属蛋白質の分子構造病態解析**  
**Integrated Analyses of Pathogenic Metalloproteins in Brain Disorders**  
 ○小川 覚之 (Tadayuki Ogawa)  
 東大・医・細胞構築 (Dept. of Med., Univ. of Tokyo)

## 蛋白質科学会アーカイブ WS：蛋白質を多角的に捉える NMR 新技術 PSSJ Archives WS: Novel NMR techniques for diversified protein analysis

NMR 法により原子分解能かつ広範な時間スケールの蛋白質解析が可能だが、像を直接得ることができず測定も複雑である。しかし、測定手法に趣向を凝らすことにより新たな構造や物性の情報が得られる可能性を秘めている。本ワークショップでは、近年発展を遂げている最先端の次世代 NMR 法として、細胞内測定、巨大試料の観測、超高感度化といった蛋白質のそのままの姿をうまく測定する手法や、光照射や攪拌といった系に摂動を与える手法を紹介する。

NMR method allows the analysis of proteins at the atomic resolution and over a wide time scale, whereas it is not possible to acquire images directly and the measurement is complicated. However, novel information on the structural and physical properties can be obtained by elaborating on the measurement techniques. Here, we introduce methods for measuring intact protein samples, such as intracellular measurement, measurement of large samples, and sensitivity-enhanced signal detection, as well as methods for perturbing systems such as light irradiation and stirring, as the cutting-edge next-generation NMR method.

オーガナイザー：森本 大智（京都大学）、松田 知己（大阪大学）

Organizers: Daichi Morimoto (Kyoto Univ.), Tomoki Matsuda (Osaka Univ.)

[18:00] **Introduction**

**WS3-01** [18:03] **溶液 NMR による多様な創薬モダリティに対する動的構造創薬**

**Dynamic structure-guided drug development for multiple pharmacological modalities by solution NMR spectroscopy**

○竹内 恒 (Koh Takeuchi)

産総研・細胞分子 (Cell Mol Biotech, AIST)

**WS3-02** [18:27] **A combinatorial acquisition of distinct protein NMR spectra based on multiplicity-dependent resonance editing**  
(1P-48)

○吉村 優一<sup>1</sup> (Yuichi Yoshimura)、ムルダー フランス<sup>2</sup> (Frans Mulder)

<sup>1</sup>阪大・蛋白研 (Inst. Protein Res., Osaka Univ.)、<sup>2</sup>オーフス大学・化学科 & iNANO (Dept. Chemistry and iNANO, Aarhus Univ.)

**WS3-03** [18:51] **生体系メソスケール構造研究に向けた動的核偏極(DNP)・固体 NMR 法—装置と方法論の開発**  
**Dynamic Nuclear Polarization (DNP) MAS NMR for Mesoscopic Structural Biology - Development of Methods and Instruments -**

○松木 陽 (Yoh Matsuki)

阪大・蛋白研 (Institute for Protein Research, Osaka Univ.)

**WS3-04** [19:15] **固体 NMR による微生物型ロドプシンの光誘起構造変化の検出**  
**Light-induced conformational changes in microbial rhodopsins as studied by solid-state NMR**

○川村 出 (Izuru Kawamura)

横国大・院・理工 (Grad. Sch. Eng. Sci., Yokohama Natl. Univ.)

**WS3-05** [19:39] **Rheo-NMR によるタンパク質のアミロイド線維化過程のリアルタイム計測**  
**Real-time measurement of amyloid fibrillation processes of a protein by using Rheo-NMR**

岩川 直都<sup>1</sup> (Naoto Iwakawa)、Erik Walinda<sup>2</sup>、森本 大智<sup>1</sup> (Daichi Morimoto)、

○菅瀬 謙治<sup>1</sup> (Kenji Sugase)

<sup>1</sup>京大・工 (Grad Sch. of Eng., Kyoto Univ.)、<sup>2</sup>京大・医 (Grad Sch. of Med., Kyoto Univ.)

## WS3-06

[20:03] 複数の異なる NMR データの統合解析によるタンパク質 multi-state 立体構造解析

**Multi-state protein structure determination by integrated analysis of multiple NMR data sets**

○池谷 鉄兵 (Teppei Ikeya)、伊藤 隆 (Yutaka Ito)

都立大・理・化学 (Dept. of Chem., Grad. Sch. of Sci., Tokyo Metropolitan Univ.)

[20:27] Conclusion

## APPA/PSSJ ワークショップ 蛋白質研究の世界連携に向けて APPA/PSSJ Joint Workshop Toward International Cooperation in Protein Science

Asia Pacific Protein Association (APPA) は、アジア太平洋地域での蛋白質研究の協力と発展を目指して2004年に設立され、シンポジウムを3年おきに開催している。2020年の2020WCPSと同時に札幌で開催の予定であったが、COVID-19のために中止となっている。次回のAPPAシンポジウムへのキックオフとして本ワークショップを行う。APPAの代表による発表に加えて、今後の連携について、ラウンドテーブルディスカッションを行う。

The Asia Pacific Protein Association (APPA) was established in 2004 with the aim of cooperating and developing protein research in the Asia-Pacific region, and holds symposiums every three years. It was scheduled to be held in Sapporo at the same time as 2020 WCPS in 2020, but it has been canceled due to COVID-19. This workshop will be held as a kick-off to the next APPA symposium. In addition to the presentation by the representative of APPA, a round table discussion on the future cooperation will be conducted.

オーガナイザー：養王田 正文（東京農工大学）、James R. Ketudat Cairns (Suranaree Univ. of Technology)  
Organizers: Masafumi Yohda (Tokyo Univ. of Agriculture and Technology),

James R. Ketudat Cairns (Suranaree Univ. of Technology)

### [9:45] Opening Remarks

- James R. Ketudat Cairns  
Suranaree Univ. of Tech.

### WS4-01 [9:50] Proteogenomic landscape of extracellular vesicles (EVs): functional insights and diagnostic potential

- Richard J. Simpson<sup>1</sup>、Rong Xu<sup>1,2</sup>、Wittaya Suwakulsiri<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Biochemistry and Genetics, La Trobe Institute for Molecular Science (LIMS), La Trobe University,  
<sup>2</sup>NanoBiotechnology Laboratory, Australian centre for Blood Diseases, Central Clinical School, Monash University

### WS4-02 [10:04] The High-throughput Genetically Directed Crosslinking Analysis Reveals the Physiological Relevance of the ATP Synthase “Inserted” State

- Zengyi Chang

State Key Laboratory of Protein and Plant Gene Research, School of Life Sciences, Center for Protein Science, Peking University

### WS4-03 [10:18] The Asia Pacific Protein Association and Collaboration with Asia-Pacific Partners

- James R. Ketudat Cairns<sup>1,2,3</sup>、Jisnuson Svasti<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>School of Chemistry, Institute of Science, Suranaree University of Technology,

<sup>2</sup>Laboratory of Biochemistry, Chulabhorn Research Institute,

<sup>3</sup>Department of Biochemistry, Faculty of Biotechnology and Biomolecular Sciences, Universiti Putra Malaysia,

<sup>4</sup>Department of Biochemistry, Faculty of Science, Mahidol University

### WS4-04 [10:32] Putting ENAH EVH1 binders in context

- Amy E. Keating<sup>1</sup>、Theresa Hwang<sup>2</sup>、Meucci Watchman Ilunga<sup>2</sup>、Robert A. Grant<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Professor of Biology and Biological Engineering, Massachusetts Institute of Technology,

<sup>2</sup>Department of Biology, Massachusetts Institute of Technology

**WS4-05** [10:46] **Delivery of Recombinant SARS-CoV-2 Envelope Protein into Human Cells**

James M. Hutchison<sup>1,2</sup>、Ricardo Capone<sup>2,3</sup>、Dustin D. Luu<sup>4,5</sup>、Arina Hadziselimovic<sup>2,3</sup>、Wade D. Van Horn<sup>4,5</sup>、○ Charles R. Sanders<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Chemical and Physical Biology Graduate Program, Vanderbilt University,

<sup>2</sup>Center for Structural Biology, Vanderbilt University、<sup>3</sup>Department of Biochemistry, Vanderbilt University、

<sup>4</sup>School of Molecular Sciences, Arizona State University.

<sup>5</sup>The Biodesign Institute Centers for Personalized Diagnostics and Mechanisms of Evolution, Arizona State University

**WS4-06** [11:00] **STRUCTURE DETERMINATION AND IMMOBILIZATION OF AN ORGANIC SOLVENT-TOLERANT ELASTASE FROM *PSEUDOMONAS* SP.**

Muhammad Syafiq Mohd Razib、Zatty Syamimi @ Adura Mat Said、Raja Noor Zaliha Raja Abd Rahman、Adam Leow Thean Chor、Abu Bakar Salleh、○ Mohd Shukuri Mohamad Ali

Enzyme and Microbial Technology Research Centre, Faculty of Biotechnology and Biomolecular Sciences, Universiti Putra Malaysia

**WS4-07** [11:14] **Smallpox virus chemokine-binding proteins have strong anti-inflammatory properties**

○ Kurt L. Krause<sup>1</sup>、Ellie Torbati<sup>1</sup>、Lyn Wise<sup>2</sup>、Saeed Sharif<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Dept. of Biochemistry, Univ. of Otago、<sup>2</sup>Dept. of Pharmacology, Univ. of Otago、

<sup>3</sup>Dept. of Microbiology, Univ. of Otago

**WS4-08** [11:28] **Study on the temperature-dependent oligomer dissociation mechanism of the small heat shock proteins using those from Methanogenic archaea**

○ Masafumi Yohda<sup>1</sup>、Rio Midorikawa<sup>1</sup>、Arisa Kanno<sup>1</sup>、Ken Morishima<sup>2</sup>、Rintaro Inoue<sup>2</sup>、Masaaki Sugiyama<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Biotechnology and Life Science, Tokyo University of Agriculture and Technology、

<sup>2</sup>Institute for Integrated Radiation and Nuclear Science, Kyoto University

**WS4-09** [11:42] **DEVELOPMENT OF NOVEL BACTERIAL CONSORTIUM FOR BIODEGRADATION OF PARAFFIN WAX IN CRUDE OIL**

○ Raja Noor Zaliha Raja Abdul Rahman<sup>1,2</sup>、Nur Aina Adlan<sup>1</sup>、Malihe Masomian<sup>1,4</sup>、Suriana Sabri<sup>1,2</sup>、Mohd Shukuri Mohamad Ali<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Enzyme and Microbial Technology Research Centre, Faculty of Biotechnology and Biomolecular Science, Universiti Putra Malaysia、

<sup>2</sup>Department of Microbiology, Faculty of Biotechnology and Biomolecular Science, Universiti Putra Malaysia、

<sup>3</sup>Department of Biochemistry, Faculty of Biotechnology and Biomolecular Science, Universiti Putra Malaysia、

<sup>4</sup>Centre for Virus and Vaccine Research, School of Science and Technology, Sunway University

**WS4-10** [11:56] **Targeting the BCL-2-regulated cell death pathway for the treatment of cancer**

Fairlie WD<sup>1,2,3</sup>、Arulananda S<sup>1</sup>、O'Brien M<sup>1</sup>、Harris TJ<sup>1</sup>、Tran S<sup>1,2</sup>、Steinohrt NS<sup>1</sup>、Evangelista M<sup>1</sup>、Jenkins LJ<sup>1,2</sup>、Poh AR<sup>1</sup>、Rohrbeck L<sup>4</sup>、Thapa B<sup>1</sup>、Williams DS<sup>1</sup>、Cebon J<sup>1</sup>、Behren A<sup>1</sup>、Herold MJ<sup>4</sup>、Haass NK<sup>5</sup>、Mariadason JM<sup>1</sup>、John T<sup>6</sup>、○ Lee EF<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Olivia Newton-John Cancer Research Institute、<sup>2</sup>School of Cancer Medicine, La Trobe University、

<sup>3</sup>Department of Biochemistry and Genetics, La Trobe Institute for Molecular Science、

<sup>4</sup>Walter and Eliza Hall Institute、<sup>5</sup>University of Queensland Diamantina Institute、<sup>6</sup>Peter MacCallum Cancer Centre

[12:10] **Closing Remarks**

○ Masafumi Yohda

Tokyo Univ. of Agri. and Tech.

## 高速分子動画：タンパク質の構造機能相関研究の最先端

### Non-equilibrium state molecular movies: a new frontier in structural and functional studies on proteins

#### 共催：新学術領域 高速分子動画

タンパク質で実際におこっている構造変化や化学反応を高い時間・空間分解能で連続的に追跡する『高速分子動画』の撮影が可能になり、静的な構造情報に基づいていたタンパク質の構造機能相関研究が新たな時代を迎える。本ワークショップではX線自由電子レーザーによる構造解析・ケミカルバイオロジー・計算科学・分光分野の最先端研究を推進する講演者を招き、タンパク質ダイナミクスに関連する最新の研究成果を中心に発表・討論する。

Shooting “molecular movies” by X-ray free electron lasers has enabled us to visualize structural changes in non-equilibrium states of proteins with high spatial and temporal resolution, which has opened a new era of structural and functional studies on proteins. In this workshop, we will discuss the latest research on protein structural dynamics.

オーガナイザー：南後 恵理子（東北大学）、木村 哲就（神戸大学）

Organizers: Eriko Nango (Tohoku Univ.), Tetsunari Kimura (Kobe Univ.)

[18:00] はじめに  
Opening Remarks

**WS5-01 [18:05]** 海洋微生物塩化物イオンポンプロドシン NM-R3 の機構解明

Pumping mechanism of NM-R3, a light-driven bacterial chloride importer in the rhodopsin family

大木 規央<sup>1</sup> (Mio Ohki)、 Yun Ji-hee<sup>2</sup> (Ji-Hye Yun)、 柴山 修哉<sup>3</sup> (Naoya Shibayama)、  
李 ウエンテ<sup>2</sup> (Weontae Lee)、 ○朴 三用<sup>1</sup> (Sam-Yong Park)

<sup>1</sup>横浜市大・生命医科学 (Grad. Sch. of Med. Life Science, Yokohama City Univ.),

<sup>2</sup>延世大学校理学部 (Dept. of Biochem., Yonsei Univ.), <sup>3</sup>自治医大 (Jichi Med. Univ.)

**WS5-02 [18:28]** 分子シミュレーションによるタンパク質分子機能活性化の解明

ATOMISTICALLY DECIPHERING FUNCTIONAL PROCESSES OF PROTEINS WITH MOLECULAR SIMULATIONS

○林 重彦 (Shigehiko Hayashi)

京大・理・化学 (Dept. of Chem., Grad. Sch. Science, Kyoto Univ.)

**WS5-03 [18:51]** 光エネルギーを使って内向きにプロトンを輸送するロドプシンの構造とダイナミクス

The structure and dynamics of rhodopsins inwardly transporting protons by using light energy

○井上 圭一 (Keiichi Inoue)

東大・物性研 (ISSP, Univ. of Tokyo)

**WS5-4 [19:14]  
(2P-61)** 中性子散乱により明らかとなった凍結水和水および非凍結水和水がタンパク質ダイナミクス活性化に及ぼす効果

Role of freezable and unfreezable hydration water for the activation of protein dynamics revealed by neutron scattering

○山本 直樹 (Naoki Yamamoto)

自治医科大学医学部生理学講座生物物理学部門 (Div. Biophys., Dept. of Physiol., School of Med., Jichi Med. Univ.)

- WS5-5** [19:37] ミトコンドリアタンパク質挿入装置の構造基盤  
 (2P-22) Structural basis of the mitochondrial protein assembly machinery  
 ○竹田 弘法<sup>1,2</sup> (Hironori Takeda)、包 明久<sup>3</sup> (Akihisa Tsutsumi)、吉川 雅英<sup>3</sup> (Masahide Kikkawa)、遠藤 斗志也<sup>1</sup> (Toshiya Endo)  
<sup>1</sup>京産大・生命 (Dept. of Biol., Kyoto Sangyo Univ.)、<sup>2</sup>理化学研究所 BDR (RIKEN center of BDR)、<sup>3</sup>東大・医 (Dept. of Medical., Univ. of Tokyo)

- WS5-06** [20:00] 高速原子間力顕微鏡で撮影するタンパク質の機能動態  
 Functional Dynamics of Proteins Captured By High-Speed Atomic Force Microscopy  
 ○内橋 貴之<sup>1,2,3</sup> (Takayuki Uchihashi)  
<sup>1</sup>名大・理 (Grad. Sch. of Sci., Nagoya Univ.)、<sup>2</sup>名大・糖鎖研 (iGCORE, Nagoya Univ.)、<sup>3</sup>生命創成探求センター (ExCELLS, NINS)

- [20:23] おわりに  
 Closing Remarks

## WS6 Channel 2

6月17日(木) / June 17 (Thu.) 18:00 ~ 20:30

Japanese Session

### タンパク質の液液相分離—計測、制御、応用— Liquid-liquid phase separation of proteins -measurement, regulation, and application-

タンパク質の「液液相分離」とは、分子が分散している液相の中で、分子が密に集合した液相（ドロップレット）を形成する現象である。近年、様々なタンパク質が、この液液相分離を利用し、それらの機能を制御していることが明らかとなってきた。本ワークショップでは、NMR、圧力、一分子計測、分子動力学などの物理化学的な手法を用いて、「液液相分離」の本質に迫ろうとしている研究者に講演をお願いした。さらに、添加剤による液液相分離の制御や液液相分離を利用した応用研究についても紹介していただく。

Accumulated date demonstrate that various proteins utilize a liquid-liquid phase separation for regulating their function. In this workshop, invited speakers will present various approaches for understanding the liquid-liquid phase separation and showing its application.

オーガナイザー：鎌形 清人（東北大学）、龜田 優史（産業技術総合研究所）  
 Organizers: Kiyoto Kamagata (Tohoku Univ.), Tomoshi Kameda (AIST)

- [18:00] はじめに  
 Opening Remarks  
 ○鎌形 清人 (Kiyoto Kamagata)  
 東北大学 (Tohoku Univ.)

- WS6-01** [18:05] 液一液相分離の単分子計測と制御分子設計  
 Single-molecule characterization and regulator design of liquid-liquid phase separation  
 ○鎌形 清人 (Kiyoto Kamagata)  
 東北大・多元研 (IMRAM, Tohoku Univ.)

- WS6-02** [18:25] アルギニンリッチ配列と相分離制御  
 Arginine-rich sequence and liquid-liquid phase separation  
 ○吉澤 拓也 (Takuya Yoshizawa)  
 立命大・生命 (College of Life Sciences, Ritsumeikan Univ.)

- WS6-03** [18:45] **圧力軸でみるタンパク質の液液相分離**  
**Pressure and temperature phase diagram for liquid-liquid phase separation of proteins**  
○北原 亮 (Ryo Kitahara)  
立命館大・薬 (Coll. Pharm. Sci., Ritsumeikan Univ.)
- WS6-04** [19:05] **液滴による L- 乳酸酸化酵素の活性化**  
**Enzyme activation of L-lactate oxidase by liquid droplets**  
○浦 朋人<sup>1,2</sup> (Tomoto Ura)、香川 亜子<sup>2</sup> (Ako Kagawa)、八木 宏昌<sup>2</sup> (Hiromasa Yagi)、  
柄尾 尚哉<sup>2</sup> (Naoya Tochio)、木川 隆則<sup>2</sup> (Takanori Kigawa)、美川 務<sup>2</sup> (Tsutomu Mikawa)、  
白木 賢太郎<sup>1</sup> (Kentaro Shiraki)  
<sup>1</sup>筑波大院・数理 (Pure and Appl. Sci., Univ. of Tsukuba), <sup>2</sup>理研 , BDR (RIKEN, BDR)
- WS6-05** [19:25] **細胞内分子活性を制御する人工タンパク質コンデンセート**  
**Synthetic protein condensates that regulate protein activity in living cells**  
○築地 真也 (Shinya Tsukiji)  
名工大院・工・生命応化 (Dept. of Life Sci. Appl. Chem., Grad. Sch. of Eng., NITech)
- WS6-06** [19:45] **自己成長能を有する人工細胞モデルとオンチップ無細胞バイオシステムへの展望**  
**Self-growing artificial cell reactor systems and perspectives for on-chip cell-free biosystems**  
○野地 博行 (Hiroyuki Noji)  
東大・工・応化 (Dept. of Applied Chem., Univ. of Tokyo)
- WS6-07** [20:05] **MD シミュレーションと機械学習を組み合わせたペプチド凝集傾向予測**  
**Prediction of peptide aggregation tendency by combination MD simulation and machine learning**  
来見田 遥一<sup>1</sup> (Yoichi Kurumida)、小林 海渡<sup>1</sup> (Kaito Kobayashi)、斎藤 裕<sup>1,2,3</sup> (Yutaka Saito)、  
中道 優介<sup>4</sup> (Yusuke Nakamichi)、池田 恵介<sup>5</sup> (Keisuke Ikeda)、○亀田 倫史<sup>1</sup> (Tomoshi Kameda)  
<sup>1</sup>産総研・人工知能 (AIRC, AIST)、<sup>2</sup>産総研・早稲田 OIL (AIST-Waseda Univ., CBBG-OIL)、  
<sup>3</sup>東大院・新領域 (Grad. School Frontier Sci., Univ. Tokyo)、<sup>4</sup>産総研・機能化学 (RISC, AIST)、  
<sup>5</sup>富山大・薬 (School Pharmacy, Univ. of Toyama)
- [20:25] **総合討論**  
**Discussion**  
○亀田 倫史 (Tomoshi Kameda)  
産業技術総合研究所 (AIST)

## バイオ医薬品と遺伝子治療ウイルスベクターの分析・品質管理と規制科学

### Analysis, quality control and regulatory science of biopharmaceuticals and viral vectors for gene therapy

バイオ医薬品は抗体医薬を中心に数多く実用化され、近年は、二重特異性抗体など蛋白質工学技術を生かした異なるモダリティーが開発され、品質管理や規制において固有の課題を解決する必要性が生じている。一方、組換えウイルスを用いた遺伝子治療製品も登場しており、より複雑な分析や品質管理が求められている。本ワークショップでは、バイオ医薬品に加え、遺伝子治療製品について、分野をけん引する研究者による背景と現状説明、さらに、蛋白質科学の面からの課題について議論する。

Many biopharmaceutical products, mainly antibody drugs, have been put into practical use. In recent years, different modalities utilizing protein engineering technologies such as bispecific antibodies have been developed, and it has become necessary to solve unique problems in quality control and regulation. On the other hand, gene therapy products using recombinant viruses have also appeared, and more complicated analysis and quality control are required. In this workshop, in addition to biopharmaceuticals, gene therapy products will be discussed by researchers who are leading the field, explaining the background and current situation, and issues from the aspect of protein science.

オーガナイザー：内山 進（大阪大学）、石井 明子（国立医薬品食品衛生研究所）

Organizers: Susumu Uchiyama (Osaka Univ.), Akiko Ishii (National Institute of Health Sciences)

#### WS7-01 [18:00] タンパク質凝集体 / 不溶性微粒子評価に関する規制の観点からの現状と問題

##### Current status and issues on evaluation of protein aggregates/subvisible particles in biopharmaceuticals from regulatory perspective

○柴田 寛子 (Hiroko Shibata)、木吉 真人 (Masato Kiyoshi)、原園 景 (Akira Harazono)、  
石井 明子 (Akiko Ishii)

国立衛研・生物薬品部 (DBCB, NIHS)

#### WS7-02 [18:25] Bispecific 抗体の特性解析と蛋白質科学

##### Characterization of Bispecific Antibody & Protein Science

○斎藤 智 (Satoshi Saitoh)

中外薬・品質研 (Quality Development Dept., Chugai Pharm.)

#### WS7-03 [18:50] プレフィルドシリンジ製剤中におけるタンパク質の吸着と凝集

##### Protein adsorption and aggregation in prefilled syringe formulations

○米田 早紀<sup>1</sup> (Saki Yoneda)、丸野 孝浩<sup>1</sup> (Takahiro Maruno)、森 飛鳥<sup>1</sup> (Asuka Mori)、  
日置 彩那<sup>1</sup> (Ayana Hioki)、西海 遥夏<sup>1</sup> (Haruka Nishiumi)、福原 彩乃<sup>2</sup> (Ayano Fukuhara)、  
原内 洋輔<sup>3</sup> (Yosuke Harauchi)、足達 慧<sup>3</sup> (Satoru Adachi)、奥山 久美<sup>3</sup> (Kumi Okuyama)、  
澤口 太一<sup>3</sup> (Taichi Sawaguchi)、鳥巣 哲生<sup>1</sup> (Tetsuo Torisu)、内山 進<sup>1,4</sup> (Susumu Uchiyama)

<sup>1</sup>阪大・工・生命先端 (Dept. Biotech. Grad. Sch. Eng. Osaka Univ.)、<sup>2</sup>ユー・メディコ (U-Medico Inc.)、

<sup>3</sup>日本ゼオン (ZEON Corp.)、<sup>4</sup>生命創成探究センター (ExCELLS)

#### WS7-04 [19:10] 遺伝子治療の開発動向と課題

##### Trends and challenges in the emerging gene therapy

○岡田 尚巳 (Takashi Okada)

東大・医科研・分子遺伝医学 (Div. of Mol. Med. Gen., Univ. of Tokyo)

#### WS7-05 [19:40] 遺伝子治療用ウイルスベクターの製造

##### Manufacturing of viral vector for gene therapy

○峰野 純一 (Junichi Mineno)

タカラバイオ株式会社 (Takara Bio Inc.)

**WS7-06** [20:05] 遺伝子治療ウイルスベクター・アデノ随伴ウイルスの分析と品質管理  
**Biophysical characterization and quality control of adeno-associated virus vector for gene therapy**  
○内山 進 (Susumu Uchiyama)  
阪大・工・生物工学 (Dept. Biotech., Grad Sch. Eng., Osaka Univ.)

**発動分子科学：生体分子モーターから、人工分子機械まで****Molecular Engines: From Biological Molecular Motors To Artificial Molecular Machines****共催：新学術領域 発動分子科学**

タンパク質は分子機械と呼ばれ、精緻な機械のようにナノスケールで働いている。近年、そのような生体分子モーターの動作原理に学び、人工的に分子機械を設計しようという試みがなされるようになってきた。そこで重要なコンセプトは、「発動分子」すなわち、機械的運動によって、エネルギー変換を実現する分子である。本ワークショップでは、生体発動分子の構造的・計算的解析から、新規人工発動分子の設計まで議論する。本ワークショップは、文部科学省科学研究費新学術領域「発動分子科学」の共催です。

Proteins are called molecular machines, which precisely work like machines on the nanoscale. Recently, on the basis of understanding molecular mechanisms of biological molecular motors, designs of artificial molecular machines have been attempted. The key concept is the molecular engine, which generates mechanical motions by receiving external energy, and converts it to another form of energy. In this workshop, recent advances on molecular engines from structural and computational analyses of biological molecular engines to designs of novel artificial molecular engines will be discussed.

オーガナイザー：池口 満徳（横浜市立大学）、村田 武士（千葉大学）

Organizers: Mitsunori Ikeguchi (Yokohama City Univ.), Takeshi Murata (Chiba Univ.)

**WS8-01 [9:45] 膜タンパク質を模倣した人工分子の設計その機能****Development of functional molecules mimicking transmembrane proteins**

○金原 数 (Kazushi Kinbara)

東京工業大学 (Tokyo Inst. Tech.)

**WS8-02 [10:19] タンパク質ブロックを組み合わせて新しい生物分子モーターをデザインする****Designing novel biomolecular motors by combining protein building blocks**

○古田 健也 (Ken'ya Furuta)

情報通信研究機構 (NICT)

**WS8-03 [10:48] 人工タンパク質針の動的機能設計****Design of dynamic functions of artificial protein needles**

○上野 隆史 (Takafumi Ueno)

東工大・生命理工 (School of Life Sci. and Tech., Tokyo Tech)

**WS8-04 [11:17] Synchronous operation of bio-molecular engines**

○角五 彰 (Akira Kakugo)

北大院理 (Dept. of Sci. Hokkaido Univ.)

**WS8-05 [11:46] 発動分子の分子動力学シミュレーション****Molecular Dynamics Simulations of Molecule Engines**

○池口 満徳<sup>1,2</sup> (Mitsunori Ikeguchi)

<sup>1</sup>横浜市大・生命医 (Grad. Sch. of Med. Life Sci., Yokohama City Univ.)、<sup>2</sup>理研・計算科学セ (RIKEN, R-CCS)

## 抗体工学と蛋白質科学の親和性成熟化－抗体利用の新たな可能性－ Synergistic development of protein science and antibody engineering

高い特異性と親和性によって抗原に結合する抗体は、構造解析ツールとしても用いられ、X線結晶解析における結晶化シャペロンとしての利用は、その最たる例である。そして、近年では、技術革新の目覚ましいクライオ電子顕微鏡単粒子解析においても有用性が認識されている。本ワークショップでは、蛋白質科学に留まらず生命科学全般にも波及効果をもたらしうる新規抗体ラベリング技術の開発や機能性抗体の樹立と応用の実例を示し、現状の課題や今後の可能性について議論する。

Usefulness of antibody fragments has been widely accepted in both x-ray crystallography and cryo-EM. This workshop will be focused on the development of novel functional antibodies and antibody-labeling techniques, which will contribute to the advancement of not only protein science but also life science in general.

オーガナイザー：禾 晃和（横浜市立大学）、日野 智也（鳥取大学）

Organizers: Terukazu Nogi (Yokohama City Univ.), Tomoya Hino (Tottori Univ.)

### [9:45] 主旨説明

- 日野 智也 (Tomoya Hino)  
鳥取大学 (Tottori Univ.)

### WS9-01 [9:51] ペプチドタグシステムを用いた新規抗体エピトープ解析法の開発

#### Development of a novel epitope-mapping method using a peptide-tag system

- 加藤 幸成 (Yukinari Kato)、浅野 祐三 (Teizo Asano)、金子 美華 (Mika Kaneko)  
東北大・医・抗体創薬 (Tohoku Univ. Grad. Sch. Med.)

### WS9-02 [10:15] 標的タンパク質へのPAタグ挿入方法の最適化によるNZ-1ラベリング法の一般化

#### Generalization of NZ-1 labeling through optimization of the PA tag insertion method into target proteins

- 禾 晃和 (Terukazu Nogi)  
横浜市大・生命医 (Grad. Sch. of Med. Lif. Sci., Yokohama City Univ.)

### WS9-03 [10:39] インテグリン / ラミニンの構造学的研究へのFv-claspの応用

#### Application of Fv-clasp to structural studies of integrin/laminin

- 有森 貴夫<sup>1</sup> (Takao Arimori)、宮崎 直幸<sup>2</sup> (Naoyuki Miyazaki)、高木 淳一<sup>1</sup> (Junichi Takagi)  
<sup>1</sup>阪大・蛋白研 (IPR, Osaka Univ.)、<sup>2</sup>筑波大・生存ダイナミクス研 (TARA, Univ. of Tsukuba)

### WS9-04 [11:03] ISAAC法を用いたTCR様抗体の効率的な取得法の開発とがん免疫療法への応用

#### (3P-76) Rapid and efficient generation of T cell receptor-like antibodies using the ISAAC method and its application to cancer immunotherapy

- 小澤 龍彦<sup>1</sup> (Tatsuhiko Ozawa)、中村 友子<sup>2</sup> (Tomoko Nakamura)、小林 栄治<sup>1</sup> (Eiji Kobayashi)、浜名 洋<sup>1</sup> (Hiroshi Hamana)、林 篤志<sup>2</sup> (Atsushi Hayashi)、村口 篤<sup>1</sup> (Atsushi Muraguchi)、岸 裕幸<sup>1</sup> (Hiroyuki Kishi)

<sup>1</sup>富山大・医・免疫 (Dept. Immunol., Fac. Med., Univ. of Toyama),

<sup>2</sup>富山大・医・眼科 (Dept. Ophthalmol., Fac. Med., Univ. of Toyama)

### WS9-05 [11:27] 温度感受性抗原抗体反応とTHETAシステム

#### Temperature-sensitive antigen-antibody reaction and thermal-elution-based-tag (THETA) system

- 岡野 俊行 (Toshiyuki Okano)

早大・先進理工・電生 (Dept. Elec. Eng. Biosci., Grad. Sch. Adv. Sci. Eng., Waseda Univ.)

**WS9-06 [11:51] SARS-CoV-2 に対する人工抗体の高速創製****Rapid development of antibody-like proteins against SARS-CoV-2**

- 村上 裕<sup>1,4</sup> (Hiroshi Murakami)、近藤 太志<sup>1</sup> (Taishi Kondo)、岩谷 雅康<sup>2,3</sup> (Masayasu Iwatani)、  
松岡 和弘<sup>2</sup> (Kazhiro Matsuoka)、藤野 公茂<sup>1</sup> (Tomoshige Fujino)、梅本 駿<sup>1</sup> (Shun Umemoto)、  
横幕 能行<sup>2</sup> (Yoshiyuki Yokomaku)、林 剛介<sup>1</sup> (Gosuke Hayashi)

<sup>1</sup>名大院・工 (Grad. Sch. of Eng., Nagoya Univ.)、<sup>2</sup>名医セ (CRC, Natl. Hosp. Org., Nagoya Med. Ctr.)、<sup>3</sup>名大院医 (Grad. Sch. of Med., Nagoya Univ.)、<sup>4</sup>名大ナノライフ (Inst. of Nano-Life-Systems, Nagoya Univ.)**WS10 Channel 3**

6月18日(金) / June 18 (Fri.) 9:45 ~ 12:15

Japanese Session

**細胞内機能を支配するタンパク質分子機能の多様性・特異性・協調性の動的制御機構****——動的・アロステリック制御による細胞生物学理解の深化——****Dynamic-Allosteric regulation molecular mechanism of multi-specific function of proteins in cell system**

細胞内では主にタンパク質が制御・伝達回路を形成し代謝やシグナル伝達を実に巧妙に維持制御している。一方、この絶妙な制御を実現するタンパク質の分子機構解明は進んでいない。タンパク質は動的な存在であり 鍵と鍵穴の様な単純で静的な認識モデルではその分子機構の多様性と特異性、協調性の理解は困難である。本企画では細胞内で多様な機能を発揮する様々なタンパク質の動的またはアロステリックな性質を取り組む実験・理論研究を俯瞰し議論を深めたい。

Proteins regulate cell system in a very sophisticated manner. The mechanisms that realize this exquisite control have not yet been elucidated. Proteins are dynamic entities, and it is difficult to understand the diversity, specificity, and cooperativity from static view point. Here, we would like to review and discuss the experimental and theoretical studies on the dynamic and allosteric properties that exhibit diverse multi-specific functions of proteins.

オーガナイザー：米澤 康滋（近畿大学）、土屋 裕子（産業技術総合研究所）

Organizers: Yasushige Yonezawa (Kindai Univ.), Yuko Tsuchiya (AIST)

**WS10-01 [9:45] オートエンコーダーに基づく GPCR シグナル伝達経路解析****Autoencoder-based detection of the residues involved in GPCR signaling**

- 土屋 裕子<sup>1</sup> (Yuko Tsuchiya)、種石 慶<sup>2</sup> (Kei Taneishi)、米澤 康滋<sup>3</sup> (Yasushige Yonezawa)

<sup>1</sup>産総研・人工知能研究センター (AIRC, AIST)、<sup>2</sup>理研 (RIKEN)、<sup>3</sup>近大 (KINDAI Univ.)**WS10-02 [10:10] ヒトプロスタグランジン E2 受容体 EP3-G タンパク質複合体のクライオ電子顕微鏡単粒子解析****(3P-30) Cryo-EM structure of human prostaglandin E2 receptor EP3-G protein complex**

- 寿野 良二<sup>1</sup> (Ryoji Suno)、杉田 征彦<sup>2</sup> (Yukihiko Sugita)、森本 和志<sup>3</sup> (Kazushi Morimoto)、  
辻本 浩一<sup>3</sup> (Hiroyasu Tsujimoto)、廣瀬 未果<sup>4</sup> (Mika Hirose)、寿野 千代<sup>1</sup> (Chiyo Suno)、  
野村 紀通<sup>3</sup> (Norimichi Nomura)、岩崎 憲二<sup>5</sup> (Kenji Iwasaki)、加藤 貴之<sup>3</sup> (Takayuki Kato)、  
岩田 想<sup>3</sup> (So Iwata)、小林 拓也<sup>1</sup> (Takuya Kobayashi)

<sup>1</sup>関西医科大学・医 (Med., KMU)、<sup>2</sup>京大・ウイルス再生研 (IVR, Kyoto Univ.)、<sup>3</sup>京大・医 (Med, Kyoto Univ.)、<sup>4</sup>阪大・蛋白研 (IPR, Osaka Univ.)、<sup>5</sup>筑波大・生存ダイナミクス (TARA)**WS10-03 [10:35] 生体分子のゆらぎと表現型のバラツキ****Fluctuation and Variation in biology**

- 白木 琢磨 (Takuma Shiraki)

近大・生物理工 (Kindai Univ. BOST)

**WS10-04 [11:00] 相関構造生物学による FACT を介したヒストン H3 テイルの動的構造変化の解明**

(3P-31)

**Structural characterization of dynamic changes of histone H3 N-tails through FACT using synergistic structural biology approaches**

- 津中 康央<sup>1</sup> (Yasuo Tsunaka)、大友 秀明<sup>1</sup> (Hideaki Ohtomo)、森川 耕右<sup>2</sup> (Kosuke Morikawa)、西村 善文<sup>1,3</sup> (Yoshifumi Nishimura)

<sup>1</sup>横浜市大・院・生命医科学 (Grad. Sch. of Med. Life Sci., Yokohama City Univ.),

<sup>2</sup>京大・院・生命科学 (Grad. Sch. of Biostudies, Kyoto Univ.),

<sup>3</sup>広島大・院・統合生命 (Grad. Sch. of Int. Sci. Life, Hiroshima Univ.)

**WS10-05 [11:25] ヘム蛋白質における構造機能相関の解明に向けた蛋白質ポケットとヘムの歪みの相関解析**

**Correlation analysis of the protein environment around heme and the heme distortion in hemeproteins**

- 近藤 寛子<sup>1</sup> (Hiroko X. Kondo)、飯塚 博幸<sup>2</sup> (Hiroyuki Iizuka)、舛本 現<sup>3</sup> (Gen Masumoto)、兼松 佑典<sup>4</sup> (Yusuke Kanematsu)、鷹野 優<sup>5</sup> (Yu Takano)

<sup>1</sup>北見工大・工 (Fac. Eng., Kitami Inst.Tech.)、<sup>2</sup>北大院・情報 (Grad. Sch. Info. Sci. Tech., Hokkaido Univ.),

<sup>3</sup>理研 ISC・情シス (Info. Sys. Div, RIKEN ISC)、<sup>4</sup>広大院・先進理工 (Grad. Shc. Adv. Sci. Eng., Hiroshima Univ.),

<sup>5</sup>広市大院・情報 (Grad. Sch. Info. Sci, Hiroshima City Univ.)

**WS10-06 [11:50] 計算科学シミュレーションを用いたタンパク質及びタンパク質複合体の動的相関解析の困難と新たな試み**

**Difficulties and New Challenges in Dynamic Correlation Analysis of Proteins and Protein Complexes Using Computational Science Simulation**

- 米澤 康滋 (Yasushige Yonezawa)

近大・先端研 (Inst. Adv. Tech. of Kindai)

**WS11 Channel 1**

6月18日 (金) / June 18 (Fri.) 17:30 ~ 20:00

Japanese Session

**生体分子の人工設計で切り開く生命科学研究**

**Artificial design of biomolecules on bioscience research**

近年、生体分子を人工的に改変・設計し、生命科学や医療の場で戦略的に利用しようとする研究が進展をみせている。本ワークショップでは、タンパク質・ペプチド、核酸、糖など生体分子を用いた人工設計により、その高機能化、新機能の創生、さらにはこれらのための方法論について、最先端の研究成果を紹介する。また、人工設計分子が生命科学研究に果たしうる役割と今後の展望について議論する。

Recent years, the use of the artificially modified and/or designed biomolecules for biological research and therapeutic applications are advancing. In this workshop, we will discuss the role of these molecules and future directions on bioscience field via the introduction of state-of-the-art design of proteins, peptides, nucleic acids, and sugar molecules.

オーガナイザー：真壁 幸樹（山形大学）、田中 俊一（京都府立大学）

Organizers: Koki Makabe (Yamagata Univ.), Shun-ichi Tanaka (Kyoto Prefectural Univ.)

**WS11-01 [17:30] 生体分子の人工設計で切り開く生命科学研究 概要説明**

(Opening Remarks)

**Artificial design of biomolecules on bioscience research**

- 真壁 幸樹 (Koki Makabe)

山形大・院・理工 (Grad. School. Sci. and Eng., Yamagata Univ.)

**WS11-02 [17:40] 非環状型人工核酸を用いた核酸医薬を指向する機能性核酸の設計**

**Development of nucleic acid drugs modified with acyclic nucleic acid**

- 神谷 由紀子 (Yukiko Kamiya)

名大・工・生命分子 (Dept. of Biomol. Eng., Grad. Sch. Eng., Nagoya Univ.)

**WS11-03** [18:00] 細胞内アダプターライク質の人工設計・改変に基づくタンパク質間相互作用ネットワークにおける特定相互作用の機能アノテーション

**Functional annotation of specific protein-protein interactions by using designer proteins**

○安井 典久 (Norihisa Yasui)

岡山大・院・医歯薬(薬) (Grad. Sch. of Med, Dent. and Pharm. Sci., Okayama Univ.)

**WS11-04** [18:20] 多糖の柔軟性を活用した機能性ナノ材料の開発

**Creation of fine nanomaterials utilizing a unique wrapping ability of natural polysaccharide**

○沼田 宗典 (Munenori Numata)

京都府立大院・生命環境 (Grad. Sch. of Life and Env. Sci, Kyoto Prefectural Univ.)

**WS11-05** [18:40] 蛋白質ナノブロックによる機能性人工蛋白質複合体の創製に向けて

**Toward Functional Artificial Protein Complexes Constructed from Protein Nanobuilding Blocks**

○新井 亮一<sup>1,2</sup> (Ryoichi Arai)

<sup>1</sup>信州大・バイオメディカル研・生体分子イノベ (Dept. of Biomol. Innov., Inst. for Biomed. Sci., Shinshu Univ.),

<sup>2</sup>信州大・繊維・応用生物 (Dept. of Appl. Biol., Fac. of Textile Sci. Tech., Shinshu Univ.)

**WS11-06** [19:00] エピトランスクリプトームを制御する人工タンパク質の創製

**Tailor-made proteins controlling the epitranscriptome**

○今西 未来 (Miki Imanishi)

京大・化研 (Inst. for Chem. Res., Kyoto Univ.)

**WS11-07** [19:20] 人工設計タンパク質を利用する新たな酵素機能改変戦略

**Engineering by proxy: Novel strategy for engineering enzymes with synthetic designer proteins**

○田中 俊一 (Shun-ichi Tanaka)、雨坂 心人 (Hiroshi Amesaka)、高野 和文 (Kazufumi Takano)

京都府立大学大学院・生命環境科学研究科・応用生命科学専攻 (Division of Applied Life Sciences, Graduate School of Life and Environmental Sciences, Kyoto Prefectural University)

## WS12 Channel 2

6月18日(金) / June 18 (Fri.) 17:30 ~ 20:00

Japanese Session

**画像処理を工夫してクライオ電顕で構造決定が難しいタンパク質に取り組む！**

**Customizing image processing steps for difficult cases of cryo-EM structure determination of proteins**

クライオ電顕による単粒子解析は未だ発展途上にある。データに潜む情報を可能な限り抽出し、高分解能を達成したり、構造状態などを分離するには、各タンパク質に合わせて解析計算手順を工夫したり、複数のソフトウェアを組み合わせて使う必要が頻繁にある。本ワークショップでは、構造が未知、対称性が無く特殊な形状、構造変化の大きいなどの「難しいタンパク質」の構造解析の具体例とその計算手順の詳細の発表に焦点を当てたい。

To determine the structure of “difficult protein” with near-atomic resolution using cryo-EM single particle analysis, the image processing workflow is not straightforward. Here, we will present details of SPA workflows by focusing on specific examples of difficult cases, such as unknown structure, special shape without symmetry, and large structural change.

オーガナイザー：守屋 俊夫（高エネルギー加速器研究機構）、横山 武司（東北大学）

Organizers: Toshio Moriya (High Energy Accelerator Research Organization), Takeshi Yokoyama (Tohoku Univ.)

**WS12-01** [17:30] さらなる分解能向上のためにクライオ電子顕微鏡画像処理でできること:中上級者向け講習会(OTA club)の活動成果

**Further Cryo-EM resolution improvement with image processing: Achievements of seminar series for intermediate and advanced users (OTA club)**

○守屋 俊夫 (Toshio Moriya)

高エネ研・物構研・構造生物 (SBRC, IMSS, KEK)

**WS12-02** [17:55] 高分解能クライオ電顕マップを用いた補因子の同定

**Identification of cofactors using high-resolution cryo-EM maps**

○加藤 公児<sup>1</sup> (Koji Kato)、長尾 遼<sup>1</sup> (Ryo Nagao)、沈 建仁<sup>1</sup> (Jian-Ren Shen)、  
秋田 総理<sup>1</sup> (Fusamichi Akita)、宮崎 直幸<sup>2</sup> (Naoyuki Miyazaki)

<sup>1</sup>岡大・異分野基礎研 (RIIS, Okayama Univ.)、<sup>2</sup>筑波大・TARA (TARA, Univ. of Tsukuba)

**WS12-03** [18:20] 単粒子解析法による螺旋構造解析

**Structural analysis on helical complexes by single-particle cryo-EM**

○杉田 征彦<sup>1,2</sup> (Yukihiko Sugita)

<sup>1</sup>京大・ウイルス再生研 (inFront, Kyoto Univ.)、<sup>2</sup>京大・白眉センター (Hakubi Center, Kyoto Univ.)

**WS12-04** [18:45] クライオ電子顕微鏡における観察と構造解析のあれこれ

**TIPS for cryoEM single particle analysis**

○包 明久 (Akihisa Tsutsumi)

東大・医 (Grad. Sch. Med, Univ. of Tokyo )

**WS12-05** [19:10] ステージ傾斜したクライオ電子顕微鏡像からの小分子量タンパク質の高分解能解析

**High-resolution Cryo-EM analysis of small protein from stage-tilt images**

○菅野 亮 (Ryo Kanno)

沖縄科学技術大学院大学 (Okinawa Institute of Science and Technology (OIST))

**WS12-06** [19:35] RNA ヘリックス挿入リボソームを用いた、クライオ電顕構造多型解析の検討

**Investigation of image classification for cryo-EM using RNA helix-inserted ribosomes**

○横山 武司 (Takeshi Yokoyama)

東北大・生命 (Dept. of Life Sci., Tohoku Univ.)